Environment Canada Environnement Canada

National Hydrology Research Institute

NHRI PAPER NO. 36
IWD TECHNICAL BULLETIN NO. 151

A Hybrid Numerical-Analytical Method for the Solution of Partial Differential Equations in Ground-Water Modelling

A. Vandenberg

NHRI

INLAND WATERS / LANDS DIRECTORATE
NATIONAL HYDROLOGY RESEARCH INSTITUTE
NATIONAL HYDROLOGY RESEARCH CENTRE
SASKATOON, SASKATCHEWAN, 1987
(Disponible en français sur demande)

Published by authority of
the Minister of the Environment

© Minister of Supply and Services Canada 1987

Cat. No. En 36-503/151E

ISBN 0-662-15488-6

Contents

	Page
ABSTRACT	iv
RESUME	v
INTRODUCTION	1
THE HYBRID METHOD	2
EXAMPLE	10
CONCLUSION	15
REFERENCES	16

Table

1. Comparison of solutions by three different methods..... 14

Illustrations

Figure 1. Notation used in the finite difference approximation..... 3

Figure 2. Configuration, initial values, and boundary values of the sample problem..... 10

Abstract

Many numerical problems in ground-water modelling deal with the solution of differential equations of the form

$$\delta u/\delta t = D_x (u)$$

where D_x is a differential operator in the space coordinates, but which is invariant in time. If D_x can be approximated by a finite expression involving values of u at nodal points of a finite difference grid, for example, we obtain a set of n ordinary differential equations

$$du_i/dt = Au_i + c_i, \quad i=1,n$$

where n is the number of nodes at which u is evaluated, and **A** is an n x n matrix of constant coefficients. This set of equations can be solved as

$$u_i = \sum_{j=1}^{n} b_{i,j} e^{\lambda_j t}, \quad i=1,n$$

or

$$u = Be^{\lambda j t}$$

where the λ_j are the eigenvalues of **A** and the columns of matrix B are the eigenvectors of **A**.

Résumé

De nombreux problèmes numériques en modélisation des eaux souterraines exigent la solution d'équations différentielles de la forme :

$$\delta u/\delta t = D_x (u)$$

où D_x est un opérateur différentiel selon les coordonnées spatiales, mais invariant dans le temps. Si D_x peut être approché par une expression finie faisant intervenir des valeurs de u à des noeuds d'une grille de différences finies, par exemple, on obtient un ensemble de n équations différentielles ordinaires :

$$du_i/dt = Au_i + c_i, \quad i=1,n$$

où n est le nombre de noeuds où u est évalué, et A est une matrice n x n de coefficients constants. Cet ensemble d'équations possède la solution suivante :

$$u_i = \sum_{j=1}^{n} b_{i,j} e^{\lambda_j t}, \qquad i=1,n$$

ou

$$u = Be^{\lambda_j t}$$

où les λ_j sont les valeurs propres de A et les colonnes de la matrice B, les vecteurs propres de A.

A Hybrid Numerical-Analytical Method for the Solution of Partial Differential Equations in Ground-Water Modelling

A. Vandenberg

INTRODUCTION

In standard finite difference and finite element procedures for the solution of differential equations, both the time derivative $\delta u/\delta t$ as well as the space derivatives are approximated by a finite expression, resulting in a set of n equations, one for each of n locations in the space domain defined by the boundary conditions. These equations can then be solved simultaneously or explicitly for the values of u at one time step, Δt, following the time for which the initial condition is given at first, and thereafter at a time step, Δt, following the time of the previous solution. Since for an accurate solution the time steps must be kept rather small, a large number of steps will often be required even though the solution may be needed only at one point in time. It is, however, possible to find a solution that is continuous in time and discrete only in the space coordinates by approximating the space derivatives in terms of finite differences, but leaving the time derivative in its infinitesimal form. It will be shown how the resulting set of simultaneous differential equations can be solved giving u_i, the value of u at all the n locations, as an analytical function of time. For ease of presentation, the method will be demonstrated for a set of only three locations. The general equations for n nodes will then be given in matrix notation, and finally the method will be illustrated by a three-point problem.

THE HYBRID METHOD

Although the method can be applied to any linear partial differential equation, the discussion will be based on the parabolic equation in two-dimensional space

$$\partial u/\partial t = \alpha \partial^2 u/\partial x^2 + \beta \partial^2 u/\partial y^2 + \gamma \qquad (1)$$

where the α, β, and γ are invariant with time.

In the hybrid method, Equation 1 is replaced by an approximate form, for example,

$$\partial u_{i,j}/\partial t = (\alpha_{i,j}/\Delta x^2)(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + (\beta_{i,j}/\Delta y^2)(u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}) + \gamma_{i,j} \qquad (2)$$

The subscripts i and j indicate that the values of u, α, β, and γ are the values at the intersections of the ith north-south line and the jth east-west line of a regular grid, with spacings of Δx in the east-west direction and Δy in the north-south direction (Fig. 1).

Writing out Equation 2 once for each of the nodes (i,j) results in the set of ordinary differential equations

$$\begin{aligned} du_1/dt &= a_{11}\, u_1 + a_{12}\, u_2 + a_{13}\, u_3 + c_1 \\ du_2/dt &= a_{21}\, u_1 + a_{22}\, u_2 + a_{23}\, u_3 + c_2 \\ du_3/dt &= a_{31}\, u_1 + a_{32}\, u_2 + a_{33}\, u_3 + c_3 \end{aligned} \qquad (3)$$

or in matrix notation

$$du/dt = Au + c \qquad (4)$$

where **A** is the matrix

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

and c is a vector of constants, deriving in part from the constants γ in Equation 1 and partially from constant values of u on the boundaries of the domain of definition of u, as will be shown in the example. The

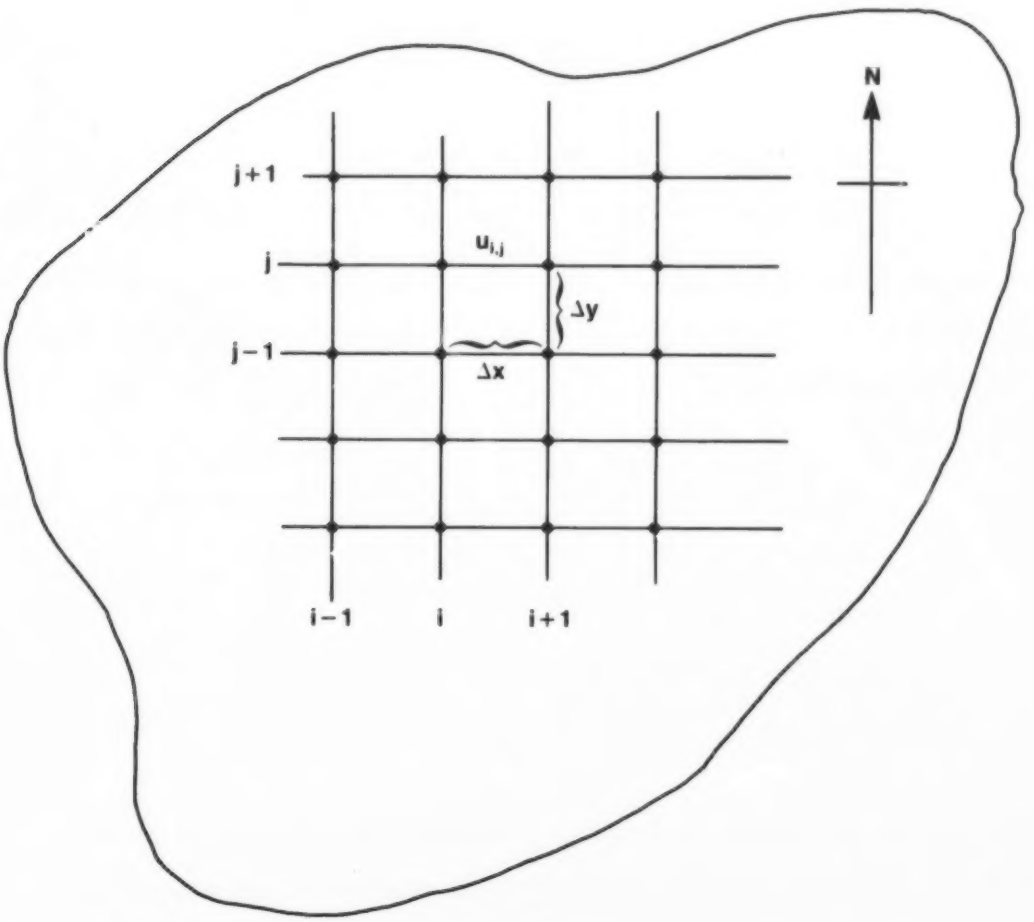

Figure 1. Notation used in the finite difference approximation.

boundary conditions, which are an integral part of the problem, are thus already contained in Equations 3 and 4, but a set of initial conditions must be defined:

$$u_i \ (t=0) = u_{oi} \tag{5}$$

It will now be shown that a solution to the set of ordinary differential equations (4), subject to the initial conditions (5), exists, which has the form

$$u_1 = b_{\infty 1} + b_{11} \ e^{\lambda_1 t} + b_{12} \ e^{\lambda_2 t} + b_{13} \ e^{\lambda_3 t}$$

$$u_2 = b_{\infty 2} + b_{21} \ e^{\lambda_1 t} + b_{22} \ e^{\lambda_2 t} + b_{23} \ e^{\lambda_3 t}$$

$$u_3 = b_{\infty 3} + b_{31} \ e^{\lambda_1 t} + b_{32} \ e^{\lambda_2 t} + b_{33} \ e^{\lambda_3 t}$$

or in matrix notation

$$u = b_\infty + Be^{\lambda t} \tag{6}$$

where $e^{\lambda t}$ represents the vector

$$e^{\lambda_1 t}, \ e^{\lambda_2 t} \ \ldots \ e^{\lambda_n t}$$

Note that if the system is to reach a steady state for $t \to \infty$, then all λ must be negative, and the vector b_∞ thus represents the steady state at each of the n nodes. Also, from Equation 4, at steady state,

$du/dt \to 0$, and since $u \to b_\infty$, we have

$$Ab_\infty + c = 0$$

or

$$b_\infty = -A^{-1}c \tag{7}$$

where A^{-1} is the inverse of A.

When Equation 6 is evaluated at t=0, we obtain the relations

$$\begin{aligned} u_{01} &= b_{\infty 1} + b_{11} + b_{12} + b_{13} \\ u_{02} &= b_{\infty 2} + b_{21} + b_{22} + b_{23} \\ u_{03} &= b_{\infty 3} + b_{31} + b_{32} + b_{33} \end{aligned} \tag{8}$$

which will be used later on to completely define the matrix B.

In order to find the vector λ and the matrix B, Equation 6 is differentiated:

$$du_1/dt = b_{11}\,\lambda_1\,e^{\lambda_1 t} + b_{12}\,\lambda_2\,e^{\lambda_2 t} + b_{13}\,\lambda_3\,e^{\lambda_3 t}$$

$$du_2/dt = b_{21}\,\lambda_1\,e^{\lambda_1 t} + b_{22}\,\lambda_2\,e^{\lambda_2 t} + b_{23}\,\lambda_3\,e^{\lambda_3 t}$$

$$du_3/dt = b_{31}\,\lambda_1\,e^{\lambda_1 t} + b_{32}\,\lambda_2\,e^{\lambda_2 t} + b_{33}\,\lambda_3\,e^{\lambda_3 t}$$

or

$$du/dt = B\lambda e^{\lambda t} \tag{9}$$

where $\lambda e^{\lambda t}$ is the vector $\lambda_i e^{\lambda_i t}$, i=1,n.

Combining Equations 9, 4, and 6 gives

$$\mathbf{Au} + \mathbf{c} = \mathbf{B}\lambda e^{\lambda t}$$

and

$$\mathbf{A}(b_\infty + \mathbf{B}e^{\lambda t}) + \mathbf{c} = \mathbf{B}\lambda e^{\lambda t} \tag{10}$$

which must hold for all values of t.

At very large t, and given that all λ must be negative, we find

$$\mathbf{A}b_\infty + \mathbf{c} = 0$$

which result was already obtained earlier.

Therefore Equation 10 can be rewritten

$$\mathbf{AB}e^{\lambda t} = \mathbf{B}\lambda e^{\lambda t} \tag{11}$$

The elements $(ab)_{i,j}$ of the matrix **AB** are given by

$$(ab)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}\, b_{kj}$$

and we have from Equation 11:

$$(ab)_{11}\, e^{\lambda_1 t} + (ab)_{12}\, e^{\lambda_2 t} + (ab)_{13}\, e^{\lambda_3 t} = b_{11}\, \lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{12}\, \lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{13}\, \lambda_3\, e^{\lambda_3 t} \tag{12}$$

$$(ab)_{21}\, e^{\lambda_1 t} + (ab)_{22}\, e^{\lambda_2 t} + (ab)_{23}\, e^{\lambda_3 t} = b_{21}\, \lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{22}\, \lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{23}\, \lambda_3\, e^{\lambda_3 t} \tag{13}$$

$$(ab)_{31}\, e^{\lambda_1 t} + (ab)_{32}\, e^{\lambda_2 t} + (ab)_{33}\, e^{\lambda_3 t} = b_{31}\,\lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{32}\,\lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{33}\,\lambda_3\, e^{\lambda_3 t} \tag{14}$$

From Equation 12 we deduce

$$(ab)_{11} = b_{11}\,\lambda_1$$

and from Equation 13

$$(ab)_{21} = b_{21}\,\lambda_1$$

and from Equation 14

$$(ab)_{31} = b_{31}\,\lambda_1$$

which, written out in full, give

$$\begin{aligned} a_{11}\,b_{11} + a_{12}\,b_{21} + a_{13}\,b_{31} &= b_{11}\,\lambda_1 \\ a_{21}\,b_{11} + a_{22}\,b_{21} + a_{23}\,b_{31} &= b_{21}\,\lambda_1 \\ a_{31}\,b_{11} + a_{32}\,b_{21} + a_{33}\,b_{31} &= b_{31}\,\lambda_1 \end{aligned}$$

or

$$\begin{bmatrix} (a_{11}-\lambda_1) & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & (a_{22}-\lambda_1) & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & (a_{33}-\lambda_1) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ b_{31} \end{Bmatrix} = 0$$

or

$$(A-\lambda_1 I)b_{11} = 0 \tag{15}$$

where I is the identity matrix. Similarly, by equating all terms in $e^{\lambda_2 t}$ we obtain

$$(A-\lambda_2 I)b_{12} = 0 \tag{16}$$

and equating all terms in $e^{\lambda_3 t}$

$$(A-\lambda_3 I)b_{13} = 0 \tag{17}$$

Thus the λ_i are the n eigenvalues of **A**, and the vectors

$$\begin{Bmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ b_{31} \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} b_{12} \\ b_{22} \\ b_{32} \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} b_{13} \\ b_{23} \\ b_{33} \end{Bmatrix}$$

are the eigenvectors of **A**.

For each eigenvalue λ_i, the corresponding eigenvector is determined except for an arbitrary multiplier. Thus, supposing that corresponding to each λ_j we obtained the eigenvectors $E_{i,j}$:

Eigenvalues:	λ_1	λ_2	λ_3
Eigenvectors:	$\begin{Bmatrix} E_{11} \\ E_{21} \\ E_{31} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} E_{12} \\ E_{22} \\ E_{32} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} E_{13} \\ E_{23} \\ E_{33} \end{Bmatrix}$

then the b_{ij} must obey

$$\begin{aligned} b_{11} &= k_1 E_{11} \cdot b_{12}=k_2 E_{12} \cdot b_{13}=k_3 E_{13} \\ b_{21} &= k_1 E_{21} \cdot b_{22}=k_2 E_{22} \cdot b_{33}=k_3 E_{23} \\ b_{31} &= k_1 E_{31} \cdot b_{32}=k_2 E_{32} \cdot b_{33}=k_3 E_{33} \end{aligned} \tag{18}$$

Combining Equations 8 and 18,

$$\begin{aligned} k_1E_{11} + k_2E_{12} + k_3E_{13} &= u_{01} - b_{\infty 1} \\ k_1E_{21} + k_2E_{22} + k_3E_{23} &= u_{02} - b_{\infty 2} \\ k_1E_{31} + k_2E_{32} + k_3E_{33} &= u_{03} - b_{\infty 3} \end{aligned}$$

or

$$Ek = u_o - b_\infty \tag{19}$$

and

$$k = E^{-1} (u_o - b_\infty) \tag{20}$$

where E^{-1} is the inverse of E.

With the determination of the multipliers k, the equation

$$u = b_\infty + Be^{\lambda t}$$

is completely determined, and the function u can be determined for each of the grid points at any time.

EXAMPLE

As an example of the method, the following three-point problem will be solved: Given the differential equation

$$\delta u/\delta t = \alpha\delta^2 u/\delta x^2 + \beta\delta^2 u/\delta y^2 \tag{21}$$

find expressions for u(t) at the three points inside the domain shown in Figure 2. The numbers shown in the figure on the boundary points indicate constant values there, and the numbers in brackets at the internal nodes indicate the initial condition.

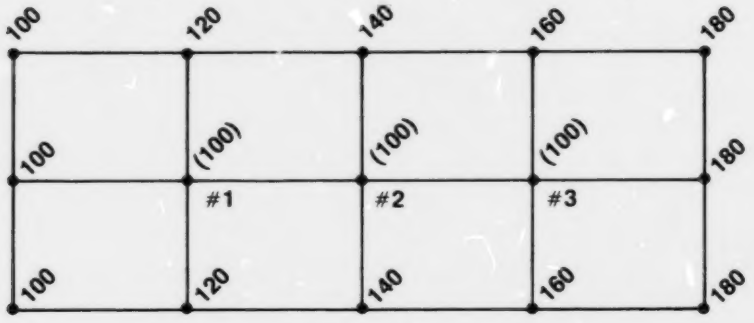

Figure 2. Configuration, initial values, and boundary values of the sample problem.

The first step in the hybrid method is to replace the right-hand side of (21) by a finite approximation, for which we choose

$$\begin{aligned} du/dt = {} & (\alpha/\Delta x^2)\,(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \\ & + (\beta/\Delta y^2)\,(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) \end{aligned} \tag{22}$$

If we choose δx and δy such that

$$\alpha/\Delta x^2 = \beta/\Delta y^2 = p$$

Equation 22 becomes

$$du/dt = p(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}) \qquad (23)$$

Writing Equation 23 for each of the interior nodes No. 1, No. 2, and No. 3, and replacing values of u on the boundaries by their constant values, we have

$$du_1/dt = p(340 - 4u_1 + u_2)$$
$$du_2/dt = p(280 + u_1 - 4u_2 + u_3)$$
$$du_3/dt = p(500 + u_2 - 4u_3)$$

or

$$du/dt = p \begin{Bmatrix} 340 \\ 280 \\ 500 \end{Bmatrix} + p \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{Bmatrix}$$

Thus

$$\mathbf{A} = p \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix}$$

and

$$\mathbf{c} = p \begin{Bmatrix} 340 \\ 280 \\ 500 \end{Bmatrix}$$

The inverse of **A** is found to be

$$\mathbf{A}^{-1} = -\frac{1}{56p} \begin{bmatrix} 15 & 4 & 1 \\ 4 & 16 & 4 \\ 1 & 4 & 15 \end{bmatrix}$$

and, from Equation 7,

$$b_{\infty 1} = 120,\ b_{\infty 2} = 140,\ \text{and}\ b_{\infty 3} = 160$$

which are the expected values (Fig. 2) at $t = -\infty$

The next step is to find λ, the three eigenvalues of **A**; that is, to determine those values of λ for which the determinant

$$\begin{vmatrix} (\lambda+4p) & -p & 0 \\ -p & (\lambda+4p) & -p \\ 0 & -p & (\lambda+4p) \end{vmatrix} = 0$$

They are

$$\lambda_1 = -4p \quad , \quad \lambda_2 = -4p + p\sqrt{2} \quad , \quad \lambda_3 = -4p - p\sqrt{2}$$

Next, find the eigenvectors by substituting λ_1, λ_2, and λ_3 in Equations 15, 16, and 17, respectively. For λ_1 and Equation 15, for example, this gives

$$\begin{bmatrix} 0 & -p & 0 \\ -p & 0 & -p \\ 0 & -p & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} E_{11} \\ E_{21} \\ E_{31} \end{Bmatrix} = 0$$

for which

$$E_{11} = 1, E_{21} = 0, E_{31} = -1$$

is a solution, and thus the eigenvector for $\lambda_1 = -4p$. Similarly the eigenvectors corresponding to λ_2 and λ_3 are determined, and the complete matrix **E** is

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

In the last step, the multipliers k_i are determined from

$$Ek = u_0 - b_\infty$$

or

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 100 - 120 \\ 100 - 140 \\ 100 - 160 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -20 \\ -40 \\ -60 \end{Bmatrix}$$

from which

$$k_1 = 20$$
$$k_2 = -20 - 20/\sqrt{2}$$
$$k_3 = -20 + 20/\sqrt{2}$$

Thus

$$B = \begin{bmatrix} 20 & (-20-20/\sqrt{2}) & (-20+20/\sqrt{2}) \\ 0 & (-20-20\sqrt{2}) & (-20+20\sqrt{2}) \\ -20 & (-20-20/\sqrt{2}) & (-20+20/\sqrt{2}) \end{bmatrix}$$

and

$$u_1 = 120 + 20e^{-4pt} - 20(1+1/\sqrt{2})e^{-pt(4-\sqrt{2})} - 20(1-1/\sqrt{2})e^{-pt(4+\sqrt{2})}$$
$$u_2 = 140 \qquad - 20(1+\sqrt{2})e^{-pt(4-\sqrt{2})} - 20(1-\sqrt{2})e^{-pt(4+\sqrt{2})}$$
$$u_3 = 160 - 20e^{-4pt} - 20(1+1/\sqrt{2})e^{-pt(4-\sqrt{2})} - 20(1-1/\sqrt{2})e^{-pt(4+\sqrt{2})}$$

Table 1 shows the hybrid solution in comparison with solutions obtained by the Crank-Nicholson method and the forward finite difference method for p = .2.

Table 1. Comparison of Solutions by Three Different Methods

Time	Node	Forward finite difference	Crank-Nicholson	Hybrid method $u = b_\infty + Be^{\lambda t}$
	1	108	106.72	106.65
1	2	116	114.02	114.02
	3	140	129.57	128.67
	1	112.8	111.31	111.23
2	2	128.8	123.98	123.79
	3	151.2	143.96	143.15
	1	116.32	114.44	114.35
3	2	134.56	130.35	130.09
	3	156.00	151.29	150.72
	1	118.18	116.52	116.42
4	2	137.38	134.25	134.01
	3	158.11	155.17	154.79
	1	119.11	117.85	117.77
5	2	138.73	136.59	136.40
	3	159.10	157.28	157.04
	1	119.79	119.21	119.16
7	2	139.70	138.82	138.71
	3	159.79	159.11	159.01

CONCLUSION

Solution by the hybrid method is carried out in six steps:

1. Define matrix **A** and vector c from the problem definition.
2. Compute the inverse of **A** and the steady state vector b using Equation 7.
3. Compute the eigenvalues and eigenvectors of **A**, the eigenvectors forming matrix **E**, columnwise.
4. Compute the multipliers k_i from

$$\mathbf{E}k = u_0 - b_\infty$$

or

$$k = \mathbf{E}^{-1} (u_o - b_\infty)$$

5. Compute the matrix **B** by multiplying the jth column of **E** by k_j:

$$b_{ij} = k_j E_{ij}$$

6. Calculate the value of the function u at any node for any time from

$$u = b_\infty + Be^{\lambda t}$$

Suitable routines for the calculation of eigenvalues and eigenvectors can be found, for example, in Wilkinson (1965) or Smith *et al.* (1974).

The hybrid method is still in the experimental stage; it has performed adequately on a 20-point problem, but the behaviour in larger problems is as yet unknown.

No data have been compiled so far on the speed of the hybrid solution in comparison with standard methods; efficiency of the method will depend largely on the availability of fast numerical routines to find eigenvalues of large, but sparse, matrices.

REFERENCES

Smith, B.T., J.M. Boyle, B.S. Garbow, Y. Ikebe, V.C. Klema, and C.B. Moler. 1974. *Matrix Eigensystem Routines*. New York: Springer-Verlag.

Wilkinson, J.H. 1965. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford: Clarendon Press.

Environnement Canada Environment Canada

Institut national de recherche en hydrologie

RAPPORT Nº 36 DE L'INRH
ÉTUDE Nº 151, COLLECTION DES RAPPORTS TECHNIQUES DE LA DGEI

Méthode hybride numérique-analytique pour la solution d'équations aux dérivées partielles en modélisation des eaux souterraines

A. Vandenberg

INRH

DIRECTION GÉNÉRALE DES EAUX INTÉRIEURES ET DES TERRES
INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN HYDROLOGIE
CENTRE NATIONAL DE RECHERCHE EN HYDROLOGIE
SASKATOON (SASKATCHEWAN) 1987
(Available in English on request)

Publié avec l'autorisation
du ministre de l'Environnement

© Ministre des Approvisionnements et Services Canada 1987

N° de cat. En 36-503/151F

ISBN 0-662-94333-3

Table des matières

Page

RESUME..... iv

ABSTRACT..... v

INTRODUCTION..... 1

LA METHODE HYBRIDE..... 2

EXEMPLE..... 9

CONCLUSION..... 15

REFERENCES..... 16

Tableau

1. Comparaison des solutions selon trois méthodes différentes... 14

Illustrations

Figure 1. Notation utilisée dans l'approximation par les différences finies..... 3

Figure 2. Configuration, valeurs initiales et valeurs frontières du problème donné en exemple..... 10

Résumé

De nombreux problèmes numériques en modélisation des eaux souterraines exigent la solution d'équations différentielles de la forme :

$$\delta u/\delta t = D_x (u)$$

où D_x est un opérateur différentiel selon les coordonnées spatiales, mais invariant dans le temps. Si D_x peut être approché par une expression finie faisant intervenir des valeurs de u à des points nodaux d'une grille de différences finies, par exemple, on obtient un ensemble de n équations différentielles ordinaires :

$$du_i/dt = Au_i + c_i, \quad i=1,n$$

où n est le nombre de noeuds où u est évalué, et A est une matrice n x n de coefficients constants. Cet ensemble d'équations possède la solution suivante :

$$u_i = \sum_{j=1}^{n} b_{i,j} e^{\lambda_j t}, \quad i=1,n$$

ou

$$u = Be^{\lambda j t}$$

où les λ_j sont les valeurs propres de A et les colonnes de la matrice B, les vecteurs propres de A.

Abstract

Many numerical problems in ground water modelling deal with the solution of differential equations of the form

$$\delta u/\delta t = D_x (u)$$

where D_x is a differential operator in the space coordinates, but which is invariant in time. If D_x can be approximated by a finite expression involving values of u at nodal points of a finite difference grid, for example, we obtain a set of n ordinary differential equations

$$du_i/dt = Au_i + c_i, \quad i=1,n$$

where n is the number of nodes at which u is evaluated, and A is an n x n matrix of constant coefficients. This set of equations can be solved as

$$u_i = \sum_{j=1}^{n} b_{i,j} e^{\lambda_j t}, \quad i=1,n$$

or

$$u = Be^{\lambda j t}$$

where the λ_j are the eigenvalues of A and the columns of matrix B are the eigenvectors of A.

Méthode hybride numérique-analytique pour la solution d'équations aux dérivées partielles en modélisation des eaux souterraines

A. Vandenberg

INTRODUCTION

Dans les procédés habituels de solution des équations différentielles au moyen des différences finies et des éléments finis, la dérivée par rapport au temps $\delta u/\delta t$, ainsi que les dérivées par rapport aux coordonnées spatiales, sont approchées par une expression finie, ce qui produit un ensemble de n équations, une pour chacun des n emplacements dans le domaine spatial défini par les conditions frontières. Ces équations peuvent être résolues simultanément ou explicitement pour les valeurs de u à un intervalle de temps, Δt, après le moment où la condition initiale est donnée, et ensuite à un intervalle de temps Δt après la solution précédente. Pour qu'on obtienne une solution précise, les intervalles de temps doivent être les plus courts possible. Par conséquent, un grand nombre d'intervalles se révéleront souvent nécessaires, même si la solution n'est parfois requise que pour un seul point dans le temps. Il est possible, toutefois, de trouver une solution qui soit continue par rapport au temps et discrète seulement par rapport aux coordonnées spatiales, en approchant les dérivées par rapport aux coordonnées spatiales au moyen des différences finies, mais en laissant la dérivée par rapport au temps sous sa forme infinitésimale. On verra comment on peut résoudre l'ensemble résultant d'équations différentielles

simultanées en donnant u_i, la valeur de u à chacun des n emplacements, comme une fonction analytique du temps. Pour simplifier la présentation, on démontrera l'application de la méthode pour trois emplacements seulement; on présentera ensuite les équations générales pour n noeuds en notation matricielle, et enfin, on illustrera la méthode au moyen d'un problème à trois points.

LA METHODE HYBRIDE

Bien que la méthode puisse s'appliquer à toute équation linéaire aux dérivées partielles, nous nous intéresserons à l'équation parabolique dans un espace bidimensionnel :

$$\partial u/\partial t = \alpha \partial^2 u/\partial x^2 + \beta \partial^2 u/\partial y^2 + \gamma \qquad (1)$$

où les α, β et γ ne varient pas avec le temps.

Dans la méthode hybride, l'équation 1 est remplacée par une approximation, par exemple :

$$\partial u_{i,j}/\partial t = (\alpha_{i,j}/\Delta x^2)(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) +$$

$$(\beta_{i,j}/\Delta y^2)(u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}) + \gamma_{i,j} \qquad (2)$$

Les indices i et j indiquent que les valeurs de u, α, β et γ sont les valeurs aux intersections de la $i^{ième}$ ligne nord-sud et de la $j^{ième}$ ligne est-ouest d'un réseau rectangulaire ayant des espacements de Δx dans la direction est-ouest et de Δy dans la direction nord-sud (figure 1).

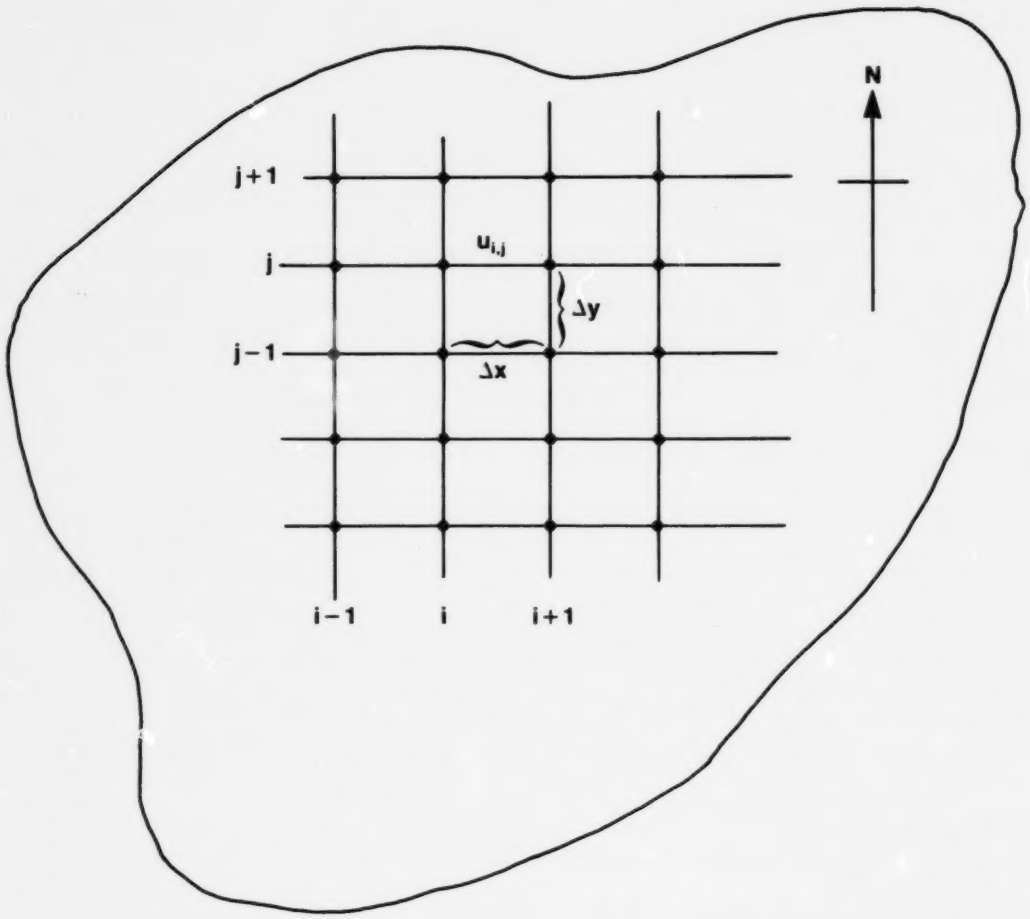

Figure 1. Notation utilisée dans l'approximation par les différences finies.

Si l'on écrit au long l'équation 2 une fois pour chacun des noeuds (i,j), on obtient l'ensemble d'équations différentielles ordinaires :

$$\begin{aligned} du_1/dt &= a_{11}\, u_1 + a_{12}\, u_2 + a_{13}\, u_3 + c_1 \\ du_2/dt &= a_{21}\, u_1 + a_{22}\, u_2 + a_{23}\, u_3 + c_2 \\ du_3/dt &= a_{31}\, u_1 + a_{32}\, u_2 + a_{33}\, u_3 + c_3 \end{aligned} \qquad (3)$$

ou, en notation matricielle

$$du/dt = Au + c \qquad (4)$$

où **A** est la matrice

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

et c est un vecteur de constantes, provenant en partie des constantes γ de l'équation 1 et en partie des valeurs constantes de u aux frontières du domaine de définition de u, comme on le verra dans l'exemple. Les conditions aux frontières, qui font partie intégrante du problème, sont donc déjà contenues dans les équations 3 et 4, mais un ensemble de conditions initiales doivent être définies :

$$u_i \ (t=0) = u_{oi} \tag{5}$$

Nous allons maintenant démontrer qu'il existe une solution à l'ensemble d'équations différentielles ordinaires 4, sous réserve des conditions initiales (5), ayant la forme suivante :

$$u_1 = b_{\infty 1} + b_{11} e^{\lambda_1 t} + b_{12} e^{\lambda_2 t} + b_{13} e^{\lambda_3 t}$$

$$u_2 = b_{\infty 2} + b_{21} e^{\lambda_1 t} + b_{22} e^{\lambda_2 t} + b_{23} e^{\lambda_3 t}$$

$$u_3 = b_{\infty 3} + b_{31} e^{\lambda_1 t} + b_{32} e^{\lambda_2 t} + b_{33} e^{\lambda_3 t}$$

ou, en notation matricielle

$$u = b_{\infty} + Be^{\lambda t} \tag{6}$$

où $e^{\lambda t}$ représente le vecteur :

$$e^{\lambda_1 t}, e^{\lambda_2 t} \quad \ldots \quad e^{\lambda_n t}$$

Notons que si le système doit atteindre un état stable pour $t \to \infty$, tous les λ doivent être négatifs et le vecteur b_∞ représente donc l'état stable à chacun des n noeuds. Aussi, d'après l'équation 4, à l'état stable, $du/dt \to 0$, et comme $u \to b_\infty$, on a :

$$\mathbf{A} b_\infty + c = 0$$

ou

$$b_\infty = -\mathbf{A}^{-1} c \tag{7}$$

où $\mathbf{A}^{-1}$ est l'inverse de $\mathbf{A}$.

Lorsque l'équation 6 est évaluée à t=0, on obtient les relations :

$$\begin{aligned} u_{01} &= b_{\infty 1} + b_{11} + b_{12} + b_{13} \\ u_{02} &= b_{\infty 2} + b_{21} + b_{22} + b_{23} \\ u_{03} &= b_{\infty 3} + b_{31} + b_{32} + b_{33} \end{aligned} \tag{8}$$

qui seront utilisées plus tard pour définir complètement la matrice B.

Afin de trouver le vecteur λ et la matrice B, on dérive l'équation 6 :

$$du_1/dt = b_{11}\,\lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{12}\,\lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{13}\,\lambda_3\, e^{\lambda_3 t}$$

$$du_2/dt = b_{21}\,\lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{22}\,\lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{23}\,\lambda_3\, e^{\lambda_3 t}$$

$$du_3/dt = b_{31}\,\lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{32}\,\lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{33}\,\lambda_3\, e^{\lambda_3 t}$$

ou

$$du/dt = B\lambda e^{\lambda t} \tag{9}$$

ou $\lambda e^{\lambda t}$ est le vecteur $\lambda_i e^{\lambda_i t}$, i=1,n.

En combinant les équations 9, 4, et 6, on obtient :

$$Au + c = B\lambda e^{\lambda t}$$

et

$$A(b_\infty + Be^{\lambda t}) + c = B\lambda e^{\lambda t} \tag{10}$$

qui doit demeurer vrai pour toutes les valeurs de t.

Pour t très grand, et étant donné que tous les λ doivent être négatifs, on a :

$$Ab_\infty + c = 0$$

ce que nous avions déjà obtenu plus tôt.

Par conséquent, l'équation 10 peut être récrite de la façon suivante :

$$ABe^{\lambda t} = B\lambda e^{\lambda t} \tag{11}$$

Les éléments $(ab)_{i,j}$ de la matrice **AB** sont donnés par

$$(ab)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}\, b_{kj}$$

et l'on a, d'après l'équation 11 :

$$(ab)_{11}\, e^{\lambda_1 t} + (ab)_{12}\, e^{\lambda_2 t} + (ab)_{13}\, e^{\lambda_3 t} = b_{11}\, \lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{12}\, \lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{13}\, \lambda_3\, e^{\lambda_3 t} \qquad (12)$$

$$(ab)_{21}\, e^{\lambda_1 t} + (ab)_{22}\, e^{\lambda_2 t} + (ab)_{23}\, e^{\lambda_3 t} = b_{21}\, \lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{22}\, \lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{23}\, \lambda_3\, e^{\lambda_3 t} \qquad (13)$$

$$(ab)_{31}\, e^{\lambda_1 t} + (ab)_{32}\, e^{\lambda_2 t} + (ab)_{33}\, e^{\lambda_3 t} = b_{31}\, \lambda_1\, e^{\lambda_1 t} + b_{32}\, \lambda_2\, e^{\lambda_2 t} + b_{33}\, \lambda_3\, e^{\lambda_3 t} \qquad (14)$$

On déduit de l'équation 12 :

$$(ab)_{11} = b_{11}\, \lambda_1$$

de l'équation 13:

$$(ab)_{21} = b_{21}\, \lambda_1$$

et de l'équation 14:

$$(ab)_{31} = b_{31}\, \lambda_1$$

Ces résultats donnent, écrits au long :

$$a_{11}\, b_{11} + a_{12}\, b_{21} + a_{13}\, b_{31} = b_{11}\, \lambda_1$$
$$a_{21}\, b_{11} + a_{22}\, b_{21} + a_{23}\, b_{31} = b_{21}\, \lambda_1$$
$$a_{31}\, b_{11} + a_{32}\, b_{21} + a_{33}\, b_{31} = b_{31}\, \lambda_1$$

ou

$$\begin{bmatrix} (a_{11}-\lambda_1) & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & (a_{22}-\lambda_1) & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & (a_{33}-\lambda_1) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ b_{31} \end{Bmatrix} = 0$$

ou

$$(A-\lambda_1 I)b_{i1} = 0 \tag{15}$$

où I est la matrice identité. De même, en égalant tous les termes en $e^{\lambda_2 t}$, on obtient :

$$(A-\lambda_2 I)b_{i2} = 0 \tag{16}$$

et en égalant tous les termes en $e^{\lambda_3 t}$, on a :

$$(A-\lambda_3 I)b_{i3} = 0 \tag{17}$$

Ainsi, les λ_i sont les n valeurs propres de **A**, et les vecteurs :

$$\begin{Bmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ b_{31} \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} b_{12} \\ b_{22} \\ b_{32} \end{Bmatrix}, \begin{Bmatrix} b_{13} \\ b_{23} \\ b_{33} \end{Bmatrix}$$

sont les vecteurs propres de **A**.

Pour chaque valeur propre λ_i, le vecteur propre correspondant est déterminé à un multiplicateur arbitraire près. Par conséquent, si l'on suppose que pour chaque λ_j on a obtenu le vecteur propre $E_{i,j}$, on a :

Valeurs propres :	λ_1	λ_2	λ_3
Vecteurs propres :	$\begin{Bmatrix} E_{11} \\ E_{21} \\ E_{31} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} E_{12} \\ E_{22} \\ E_{32} \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} E_{13} \\ E_{23} \\ E_{33} \end{Bmatrix}$

Les b_{ij} doivent donc obéir aux relations suivantes :

$$\begin{aligned} b_{11} &= k_1 E_{11} \ , \ b_{12}=k_2 E_{12} \ , \ b_{13}=k_3 E_{13} \\ b_{21} &= k_1 E_{21} \ , \ b_{22}=k_2 E_{22} \ , \ b_{33}=k_3 E_{23} \\ b_{31} &= k_1 E_{31} \ , \ b_{32}=k_2 E_{32} \ , \ b_{33}=k_3 E_{33} \end{aligned} \qquad (18)$$

On obtient, en combinant les équations 8 et 18 :

$$\begin{aligned} k_1E_{11} + k_2E_{12} + k_3E_{13} &= u_{01} - b_{\infty 1} \\ k_1E_{21} + k_2E_{22} + k_3E_{23} &= u_{02} - b_{\infty 2} \\ k_1E_{31} + k_2E_{32} + k_3E_{33} &= u_{03} - b_{\infty 3} \end{aligned}$$

ou

$$Ek = u_o - b_\infty \qquad (19)$$

et

$$k = E^{-1} (u_o - b_\infty) \qquad (20)$$

où E^{-1} est l'inverse de E.

Les multiplicateurs k ayant ainsi été calculés, l'équation :

$$u = b_\infty + Be^{\lambda t}$$

est complètement déterminée et la fonction u peut être évaluée pour chacun des points de la grille, à n'importe quel moment.

EXEMPLE

Pour illustrer l'application de la méthode, nous allons résoudre le problème suivant à trois points. Soit l'équation

différentielle :

$$\delta u/\delta t = \alpha \delta^2 u/\delta x^2 + \beta \delta^2 u/\delta y^2 \qquad (21)$$

trouver des expressions pour u(t) aux trois points se trouvant à l'intérieur du domaine illustré à la figure 2. Les nombres indiqués sur la figure aux points frontières représentent des valeurs constantes, tandis que les nombres entre parenthèses associés aux noeuds internes expriment les conditions initiales.

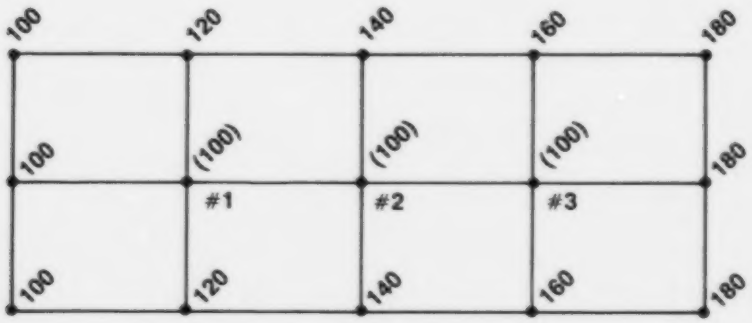

Figure 2. Configuration, valeurs initiales et valeurs frontières du problème donné en exemple.

La première étape de la méthode hybride consiste à remplacer le membre droit de l'équation 21 par une approximation finie. Nous choisissons la suivante :

$$du/dt = (\alpha/\Delta x^2)\ (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) + (\beta/\Delta y^2)\ (u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) \qquad (22)$$

et si nous choisissons δx et δy de telle façon que :

$$\alpha/\Delta x^2 = \beta/\Delta y^2 = p$$

l'équation 22 devient

$$du/dt = p(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}) \qquad (23)$$

Si l'on écrit l'équation 23 pour chacun des noeuds intérieurs n°1, n°2, n°3, et si l'on remplace les valeurs de u aux frontières par leurs valeurs constantes, on a :

$$du_1/dt = p(340 - 4u_1 + u_2)$$
$$du_2/dt = p(280 + u_1 - 4u_2 + u_3)$$
$$du_3/dt = p(500 + u_2 - 4u_3)$$

ou

$$du/dt = p \begin{Bmatrix} 340 \\ 280 \\ 500 \end{Bmatrix} + p \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{Bmatrix}$$

Par conséquent,

$$\mathbf{A} = p \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix}$$

et

$$c = p \begin{Bmatrix} 340 \\ 280 \\ 500 \end{Bmatrix}$$

On calcule l'inverse de **A**

$$\mathbf{A}^{-1} = -\frac{1}{56p} \begin{bmatrix} 15 & 4 & 1 \\ 4 & 16 & 4 \\ 1 & 4 & 15 \end{bmatrix}$$

et, d'après l'équation 7, on obtient

$$b_{\infty 1} = 120,\ b_{\infty 2} = 140,\ \text{and}\ b_{\infty 3} = 160$$

qui sont les valeurs attendues (figure 2) à $t = +\infty$

L'étape suivante consiste à trouver les trois valeurs propres de **A**; c'est-à-dire à déterminer les valeurs de λ pour lesquelles le déterminant

$$\begin{bmatrix} (\lambda+4p) & -p & 0 \\ -p & (\lambda+4p) & -p \\ 0 & -p & (\lambda+4p) \end{bmatrix} = 0$$

Ces valeurs sont les suivantes :

$$\lambda_1 = -4p \quad , \quad \lambda_2 = -4p + p\sqrt{2} \quad , \quad \lambda_3 = -4p - p\sqrt{2}$$

On trouve ensuite les vecteurs propres en insérant les valeurs λ_1, λ_2, et λ_3 dans les équations 15, 16, et 17, respectivement. Dans le cas de l'équation 15, avec λ_1, on a par exemple

$$\begin{bmatrix} 0 & -p & 0 \\ -p & 0 & -p \\ 0 & -p & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} E_{11} \\ E_{21} \\ E_{31} \end{Bmatrix} = 0$$

dont

$$E_{11} = 1, E_{21} = 0, E_{31} = -1$$

est une solution, de sorte que le vecteur propre pour $\lambda_1 = -4p$. De même, on calcule les vecteurs propres correspondant à λ_2 et λ_3 et la matrice E complète est la suivante :

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Enfin, les multiplicateurs k_1 sont déterminés d'après l'équation :

$$Ek = u_0 - b_\infty$$

ou

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 100 - 120 \\ 100 - 140 \\ 100 - 160 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -20 \\ -40 \\ -60 \end{Bmatrix}$$

d'où l'on tire

$$k_1 = 20$$
$$k_2 = -20 - 20/\sqrt{2}$$
$$k_3 = -20 + 20/\sqrt{2}$$

Par conséquent,

$$B = \begin{bmatrix} 20 & (-20-20/\sqrt{2}) & (-20+20/\sqrt{2}) \\ 0 & (-20-20\sqrt{2}) & (-20+20\sqrt{2}) \\ -20 & (-20-20/\sqrt{2}) & (-20+20/\sqrt{2}) \end{bmatrix}$$

et

$$u_1 = 120 + 20e^{-4pt} - 20(1+1/\sqrt{2})e^{-pt(4-\sqrt{2})} - 20(1-1/\sqrt{2})e^{-pt(4+\sqrt{2})}$$

$$u_2 = 140 \qquad - 20(1+\sqrt{2})e^{-pt(4-\sqrt{2})} - 20(1-\sqrt{2})e^{-pt(4+\sqrt{2})}$$

$$u_3 = 160 - 20e^{-4pt} - 20(1+1/\sqrt{2})e^{-pt(4-\sqrt{2})} - 20(1-1/\sqrt{2})e^{-pt(4+\sqrt{2})}$$

Le tableau 1 présente une comparaison entre la solution obtenue avec la méthode hybride et les solutions produites par la

Tableau 1. Comparaison des solutions selon trois méthodes différentes

Temps	Noeud	Différences finies avancées	Crank-Nicholson	Méthode hybride $u = b_\infty + Be^{\lambda t}$
1	1	108	106.72	106.65
	2	116	114.02	114.02
	3	140	129.57	128.67
2	1	112.8	111.31	111.23
	2	128.8	123.98	123.79
	3	151.2	143.96	143.15
3	1	116.32	114.44	114.35
	2	134.56	130.35	130.09
	3	156.00	151.29	150.72
4	1	118.18	116.52	116.42
	2	137.38	134.25	134.01
	3	158.11	155.17	154.79
5	1	119.11	117.85	117.77
	2	138.73	136.59	136.40
	3	159.10	157.28	157.04
7	1	119.79	119.21	119.16
	2	139.70	138.82	138.71
	3	159.79	159.11	159.01

méthode Crank-Nicholson et par la méthode des différences finies avancées pour p = .2.

CONCLUSION

La solution par la méthode hybride est obtenue en six étapes :

1. Définir la matrice **A** et le vecteur c selon les caractéristiques du problème.
2. Calculer l'inverse de **A** et le vecteur d'état stable b au moyen de l'équation 7.
3. Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de **A**, les vecteurs propres constituant les colonnes de la matrice E.
4. Calculer les multiplicateurs k_j d'après l'équation

$$Ek = u_0 - b_\infty$$

ou

$$k = E^{-1} (u_0 - b_\infty)$$

5. Calculer la matrice B en multipliant la $j^{ième}$ colonne de E par k_j:

$$b_{ij} = k_j E_{ij}$$

6. Calculer la valeur de la fonction u pour chaque noeud à n'importe quel moment d'après l'équation

$$u = b_\infty + Be^{\lambda t}$$

On peut trouver des sous-programmes utiles pour le calcul des valeurs propres et des vecteurs propres par exemple dans Wilkinson (1965) ou Smith et coll. (1974).

La méthode hybride en est encore au stade expérimental. Elle s'est révélée adéquate pour un problème à 20 points, mais son comportement vis-à-vis de problèmes plus complexes demeure inconnu.

On ne dispose encore d'aucune donnée sur la vitesse de la solution hybride comparativement aux méthodes habituelles; l'efficacité de la méthode sera largement reliée à la disponibilité de sous-programmes rapides de calcul des valeurs propres de matrices de grandes dimensions mais peu précises.

REFERENCES

Smith, B.T., J.M. Boyle, B.S. Garbow, Y. Ikebe, V.C. Klema, et C.B. Moler. 1974. *Matrix Eigensystem Routines*. New York: Springer-Verlag.

Wilkinson, J.H. 1965. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford: Clarendon Press.